Fresenius' Zeitschrift für

Analytische Chemie

Herausgegeben von W. Fresenius

unter Mitwirkung der Fachgruppe
Analytische Chemie der Gesellschaft
Deutscher Chemiker

vertreten durch
H. Bode H. Kelker H. Specker G. Tölg

International Editorial Board
D. Betteridge J. T. Clerc A. Dijkstra
H. Malissa E. Pungor Yu. A. Zolotov

Band 304 · 1980

Springer-Verlag Berlin · Heidelberg · New York
J. F. Bergmann München

The exclusive copyright for all languages and countries, including the right for photomechanical and other reproductions, is transferred to the publisher.

The use of registered names, trademarks, etc. in this publication does not imply, even in the absence of a specific statement, that such names are exempt from the relevant protective laws and regulations and therefore free for general use.

Authors of this journal can benefit from library and photocopy fees collected by VG WORT if certain conditions are met. If an author lives in the Federal Republic of Germany or in West Berlin it is recommended that he contacts Verwertungsgesellschaft WORT, Abteilung Wissenschaft, Goethestrasse 49, D-8000 München 2, for detailed information.

Die in der Zeitschrift veröffentlichten Beiträge sind urheberrechtlich geschützt. Alle Rechte, insbesondere das der Übersetzung in fremde Sprachen, vorbehalten. Kein Teil dieser Zeitschrift darf ohne schriftliche Genehmigung des Verlages in irgendeiner Form – durch Fotokopie, Mikrofilm oder andere Verfahren – reproduziert oder in eine von Maschinen, insbesondere von Datenverarbeitungsanlagen, verwendbare Sprache übertragen werden.

Auch die Rechte der Wiedergabe durch Vortrag, Funk- und Fernsehsendung, im Magnettonverfahren oder ähnlichem Wege bleiben vorbehalten.

Fotokopien für den persönlichen und sonstigen eigenen Gebrauch dürfen nur von einzelnen Beiträgen oder Teilen daraus als Einzelkopie hergestellt werden. Jede im Bereich eines gewerblichen Unternehmens hergestellte oder benützte Kopie dient gewerblichen Zwecken gem. § 54(2) UrhG und verpflichtet zur Gebührenzahlung an die VG WORT, Abteilung Wissenschaft, Goethestraße 49, D-8000 München 2, von der die einzelnen Zahlungsmodalitäten zu erfragen sind.

Autoren dieser Zeitschrift können unter gewissen Voraussetzungen in die Individualausschüttung von Mitteln aus der Bibliothektantieme und dem Fotokopieraufkommen mit einbezogen werden. Genaue Informationen erteilt die Verwertungsgesellschaft WORT, Abteilung Wissenschaft, Goethestraße 49, D-8000 München 2.

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Springer-Verlag · Berlin · Heidelberg · New York

Printed in Germany by Wiesbadener Graphische Betriebe GmbH, Wiesbaden

© by Springer-Verlag Berlin · Heidelberg 1980

Inhalt/Contents

Band 304 Heft 1 1980

erschienen/published November 1980

Originalabhandlungen

M. M. Guedes da Mota, G. H. B. Eelderink, H. B. Verbruggen, B. Griepink
Beitrag zur Modellbildung eines analytischen Säulenverfahrens. 1. Messungen (in Englisch)

W. Weuster, H. Specker
Direkte qualitative und quantitative Bestimmung von Seltenen Erden nach Trennung mittels Hochdruck-Flüssigkeits-Chromatographie (HPLC)

E. Blasius, H. Lander, M. Keller
Massenspektren von cyclischen Polyethern mit O bzw. O und N als Heteroatom im Etherring

H.-R. Schulten, R. Mueller, D. Haaks
Laser-Felddesorptions-Massenspektrometrie II. Metalle und Legierungen (in Englisch)

B. Zimmerli, H. Zimmermann
Gas-chromatographische Bestimmung von Spuren von n-Butylzinnverbindungen (Tetra-, Tri-, Di-) in Luft

G. Schwedt
Zur Literaturdokumentation in der Analytischen Chemie. II. Informationsgehalt und Aufbau von Referaten

Original Papers

1 **M. M. Guedes da Mota, G. H. B. Eelderink, H. B. Verbruggen, B. Griepink**
A Contribution to the Modelling of an Analytical Column Process. 1. Measurements

6 **W. Weuster, H. Specker**
Direct Qualitative and Quantitative Determination of Rare Earths after Separation by High Pressure Liquid Chromatography (HPLC) (in German)

10 **E. Blasius, H. Lander, M. Keller**
Mass Spectra of Cyclic Polyethers with O or O and N as Hetero-Atom in the Ether Ring (in German)

15 **H.-R. Schulten, R. Mueller, D. Haaks**
Laser Assisted Field Desorption Mass Spectrometry II. Metals and Alloys

23 **B. Zimmerli, H. Zimmermann**
GLC-Determination of Traces of n-Butyltin Compounds (Tetra-, Tri-, Di-) in the Air (in German)

28 **G. Schwedt**
Literature Documentation in Analytical Chemistry. II. Information Content and Structure of Abstracts (in German)

Band 304 Heft 2/3 1980

erschienen/published November 1980

Originalabhandlungen

D. Sommer, K. Ohls
Direkte Probeneinführung in ein stabil brennendes, induktiv gekoppeltes Plasma

M. M. Guedes da Mota, G. H. B. Eelderink, H. B. Verbruggen, B. Griepink
Beitrag zur Modellbildung eines analytischen Säulenverfahrens. II. Modellbildung (in Englisch)

E. Bayer, K. Albert, M. Nieder, E. Grom, Zhu An
Anwendungsbeispiele der direkten HPLC-NMR-Kopplung mit hoher Auflösung

Original Papers

97 **D. Sommer, K. Ohls**
Direct Sample Insertion into a Stable Running Inductively Coupled Plasma (in German)

104 **M. M. Guedes da Mota, G. H. B. Eelderink, H. B. Verbruggen, B. Griepink**
A Contribution to the Modelling of an Analytical Column Process. II. Modelling

111 **E. Bayer, K. Albert, M. Nieder, E. Grom, Zhu An**
Examples of Application of Direct HPLC-NMR-Coupling with High Resolution (in German)

W. Werner
Nachweis von Nitrit und Nitrat über die Bildung von Azofarbstoffen
117 **W. Werner**
Detection of Nitrite and Nitrate by the Formation of Azo Dyes (in German)

J. Wannemacher, H. Heilmann
Schwefelbestimmung in geologischen Proben durch Röntgenfluorescenz-Analyse (in Englisch)
125 **J. Wannemacher, H. Heilmann**
Determination of the Sulphur Content of Geological Samples by X-Ray Fluorescent Analysis

H. Hellmann
Analyse von Waschmitteln im Hinblick auf Gewässerbelastung und Abbauverhalten
129 **H. Hellmann**
Analysis of Detergents in View of Water Loading and Decomposition Behaviour (in German)

H. Steinwandter
Beiträge zur Verwendung von Kieselgel in der Pesticidanalytik. II. Analytik und Capillar-Gas-Chromatographie von δ-HCH und anderen Chlorkohlenwasserstoff-Pesticiden
137 **H. Steinwandter**
Contributions to the Application of Silica Gel in Pesticide Analysis. II. Analytics and Glass Capillary Gas Chromatography of δ-HCH and other Chlorinated Pesticides (in German)

Kurze Mitteilungen **Short Communications**

G. Drasch, L. v. Meyer, G. Kauert
Anwendung der Graphitrohrküvette zur Arsenbestimmung in biologischen Proben mit der Hydrid-AAS-Technik
141 **G. Drasch, L. v. Meyer, G. Kauert**
Application of the Furnace Atomic Absorption Method for the Detection of Arsenic in Biological Samples by Means of the Hydride Technique (in German)

S. A. Nabi, M. Khan, A. R. Siddiqui
Unterscheidung zwischen gesättigten und ungesättigten langkettigen Fettsäuren (in Englisch)
142 **S. A. Nabi, M. Khan, A. R. Siddiqui**
Differentiation between Saturated and Unsaturated Long-Chain Fatty Acids

S. Waliszewski, M. Rzepczyński
Bestimmung von Rückständen von Organochlorinsecticiden. II. Bestimmung von α-, β-, γ-, δ-, ε-HCH und HCB im Wasser
143 **S. Waliszewski, M. Rzepczyński**
Determination of Organochloroinsecticide Residues. II. Determination of α-, β-, γ-, δ-, ε-HCH and HCB in Water (in German)

J. S. Upadhyaya, S. K. Upadhyaya
DC-Trennung nahe verwandter Monoaryl-Thioharnstoffderivate (in Englisch)
144 **J. S. Upadhyaya, S. K. Upadhyaya**
TLC-Separation of Closely Related Monoaryl Substituted Thiocarbamides

Band 304 Heft 4 1980

erschienen/published Dezember 1980

Originalabhandlungen **Original Papers**

L. Domokos, E. Pretsch, H. Mändli, H. Könitzer
Cluster-Analyse massenspektrometrischer Daten
241 **L. Domokos, E. Pretsch, H. Mändli, H. Könitzer**
Cluster Analysis of Mass-Spectrometric Data (in German)

S. Noack, G. Schulze
Statistische Auswertung analytischer Meßdaten
250 **S. Noack, G. Schulze**
Statistical Evaluation of Analytical Measurements (in German)

Kurzfassungen der Vorträge und Poster anläßlich des Darmstädter Symposiums „Strukturanalyse und Theoretische Chemie", 12.—14. 3. 1980 **Short Versions of the Lectures and Posters of the Darmstadt Symposium on Structural Analysis and Theoretical Chemistry, 12.—14. 3. 1980**

Bindungselektronendichten **Bonding Electron Densities**

J.-M. Savariault, M. S. Lehmann
Deformationsdichte einer elektronenreichen Bindung: Die Sauerstoff-Sauerstoff-Bindung in Wasserstoffperoxid
255 **J.-M. Savariault, M. S. Lehmann**
Deformation Density of an Electron-Rich Bond: The Oxygen-Oxygen Bond in Hydrogen Peroxide (in German)

S. Göttlicher, C. D. Knöchel
Die Elektronendichteverteilung in Natriumnitrat

F. Schanda, A. Gieren
(X-N)-Bindungselektronendichten bei 120K am Beispiel des N-Phenyl-N'-sulfinylhydrazins

R. H. Feld, M. S. Lehmann
Die Elektronendichteverteilung im Wassermolekül von α-Oxalsäuredihydrat

J. W. Bats, H. Fuess
Elektronendichteverteilung in Formiaten, Chloraten und Thiosulfaten

J. Gasteiger, M. Marsili
Inwieweit bestimmt die Bindungsstruktur eines Moleküls die Ladungsverteilung?

R. Goddard
Theoretische Betrachtungen über die gefalteten und planaren Formen von $[(\pi\text{-Allyl})\text{-Nickel-X}]_2$ (in Englisch)

C. Krüger
Deformationsdichte-Bestimmungen in dimeren π-Allyl-Nickel-Komplexen

256 S. Göttlicher, C. D. Knöchel
Electron Density Distribution in Sodium Nitrate (in German)

256 F. Schanda, A. Gieren
(X-N) Bonding Electron Densities at 120K with N-Phenyl-N'-sulphinylhydrazine as an Example (in German)

257 R. H. Feld, M. S. Lehmann
Electron Density Distribution in the Water Molecule of α-Oxalic Acid Dihydrate (in German)

258 J. W. Bats, H. Fuess
Electron Density Distribution in Formates, Chlorates and Thiosulphates (in German)

258 J. Gasteiger, M. Marsili
To what Extent does the Bond Structure Affect the Charge Distribution in a Molecule? (in German)

259 R. Goddard
Theoretical Consideration on the Puckered and Planar Form of $[(\pi\text{-Allyl})\text{Nickel-X}]_2$

260 C. Krüger
Measurement of Deformation Densities in Cimeric π-Allyl-Nickel Complexes (in German)

Strukturbestimmung und Berechnung

D. Cremer
Wie zuverlässig sind theoretisch ermittelte r_e-Strukturen?

J. Flad, H. Stoll, H. Preuß
Strukturbestimmung von Na-Clustern bis Na_8 mit Hilfe von Pseudopotentialrechnungen

P. Hofmann
Bindungs- und Strukturaspekte in kleinen Übergangsmetall-Kohlenstoff-Ringen

R. Goddard, R. Hoffmann, E. D. Jemmis
Ungewöhnliche M-C-H-Winkel, Aktivierung der C-H-Bindung und Entzug des α-Wasserstoffs in Übergangsmetall-Carben-Komplexen (in Englisch)

G. Lehmann
Übergangsmetallionen als Sonden zur Lösung von Strukturfragen in kondensierten Systemen

U. Schubert
Ein erweitertes Bindungsmodell für Übergangsmetall-Carben-Komplexe

H. Endres
Komplexe von Ni, Pd, Pt mit aminosubstituierten Dioximen: „Ungewöhnliche" Kristall- und Molekülstrukturen

G. Henkel
$(C_5H_5FeS_{1.5})_4$: Ein neuartiger vierkerniger Fe-S-Cluster in einer $(C_5H_5FeS)_4$-Matrix

Determination of Structures and Calculation

261 D. Cremer
To what Extent are Theoretically Determined r_e-Structures Reliable? (in German)

262 J. Flad, H. Stoll, H. Preuß
Structure Determination of Na Clusters up to Na_8 by Means of Pseudopotential Calculations (in German)

262 P. Hofmann
Aspects of Bonding and Structure in Small Transition Metal-Carbon Rings (in German)

263 R. Goddard, R. Hoffmann, E. D. Jemmis
Unusual M-C-H Angles, C-H Bond Activation, and α-Hydrogen Abstraction in Transition Metal Carbene Complexes

263 G. Lehmann
Transition Metal Ions as Probes for the Solution of Structure Problems (in German)

264 U. Schubert
Extended Bonding Model for Transition Metal-Carbene Complexes (in German)

265 H. Endres
Complexes of Ni, Pd, Pt with Amino-substituted Dioximes: "Unusual" Crystal and Molecular Structures (in German)

265 G. Henkel
$(C_5H_5FeS_{1.5})_4$: A New Quadrinuclear Fe-S Cluster in a $(C_5H_5FeS)_4$ Matrix (in German)

H. J. Berthold, B. G. Kruska, W. Ludwig, R. Wartchow
Die Orientierungsfehlordnung im Gitter der ClO_4^--Anionen in den kubischen Hochtemperaturphasen von Natrium- und Silberperchlorat

266 H. J. Berthold, B. G. Kruska, W. Ludwig, R. Wartchow
Orientational Disorder in the Lattice of the ClO_4^--Anions in the Cubic High-Temperature Phases of Sodium and Silver Perchlorate (in German)

W. S. Sheldrick
Stereochemie des intramolekularen Ligandenaustausches bei Derivaten des pentakoordinierten Phosphors: „Anti"-Berry-Verzerrungen in mono- und bicyclischen Phosphoranen

266 W. S. Sheldrick
Stereochemistry of the Intramolecular Ligand Exchange in Derivatives of Penta-coordinated Phosphorus: "Anti"-Berry Distortions in Mono- and Bicyclic Phosphoranes (in German)

W. Dörrscheidt, H. Schäfer
Isolierte Thioantimonitanionen in Erdalkalithioantimoniten

267 W. Dörrscheidt, H. Schäfer
Isolated Thioantimonite Anions in Alkaline Earth Thioantimonites (in German)

M. Dräger, B. Mathiasch, A. Blecher
Korrelation zwischen Bindungslängen und -winkeln, Valenzkraftkonstanten und NMR-Kopplungen in $Se_2Sn_3Me_6$ und $Se_3Sn_3Me_6$

268 M. Dräger, B. Mathiasch, A. Blecher
Correlations between Bond Length and Angles, Force Constants and NMR Coupling in $Se_2Sn_3Me_6$ and $Se_3Sn_3Me_6$ (in German)

H. Irngartinger, K. L. Lukas, A. Goldmann
Bindungsverhältnisse in Bicyclo-[1.1.0]-butan-Derivaten

269 H. Irngartinger, K. L. Lukas, A. Goldmann
Bonding Conditions in Bicyclo(1.1.0)butane Derivatives (in German)

S. Durmaz, H. Kollmar
Einfluß von Substituenten auf die Struktur von Cyclopropanen

269 S. Durmaz, H. Kollmar
Effect of Substituents on the Structure of Cyclopropanes (in German)

H. Kollmar
Antiaromatizität und Struktur von Cyclobutadienen

270 H. Kollmar
Anti-Aromaticity and Structure of Cyclobutadienes (in German)

G. Schrumpf, A. W. Klein
Die Abhängigkeit von CC-Bindungslängen von Hybridisierung und Konjugation

270 G. Schrumpf, A. W. Klein
Dependence of C-C Bond Length on Hybridization and Conjugation (in German)

P. Bachmann, W. Weyrich
Comptonspektroskopische Untersuchungen kovalenter Bindungen

271 P. Bachmann, W. Weyrich
Compton Spectroscopic Investigation of Covalent Bonds (in German)

A. Gieren, V. Lamm, R. C. Haddon, M. L. Kaplan, M. J. Perkins, P. Flowerday
Zur Frage der Vierbindigkeit des Schwefels bei Schwefeldiimiden

271 A. Gieren, V. Lamm, R. C. Haddon, M. L. Kaplan, M. J. Perkins, P. Flowerday
On the Question of the Quadrivalence of Sulphur in Sulphur Diimides (in German)

V. Lamm, A. Gieren, B. Dederer
Korrelationen zwischen benachbarten Chalkogen-Stickstoff-Bindungen inner- und zwischenmolekularer Art

272 V. Lamm, A. Gieren, B. Dederer
Correlations between Adjacent Chalcogen-Nitrogen Bonds of the Intra- and Intermolecular Type (in German)

D. Mootz, H.-G. Wussow
Zur molekularen Packung von Acetonitril, Methylisocyanid und Propin in ihren nicht isotypen Kristallstrukturen

273 D. Mootz, H.-G. Wussow
On the Molecular Packing of Acetonitrile, Methylisocyanide and Propine in their Non-Isotypic Crystal Structures (in German)

D. Bougeard
Schwingungsspektroskopische Bestimmung der zwischenmolekularen Kräfte in organischen Molekülkristallen

274 D. Bougeard
Determination of the Intermolecular Forces in Organic Molecular Crystals by Vibrational Spectroscopy (in German)

W. Haase, H. Paulus
Kristallstrukturen einiger mesogener Moleküle und mögliche Aussagen über den flüssig-kristallinen Zustand

275 W. Haase, H. Paulus
Crystal Structures of some Mesogenic Molecules and Possible Statements on the Liquid-Crystalline State (in German)

D. Cremer
Konformationsanalyse von Ringverbindungen

H. Siebels, A. Gieren
Vergleichende Strukturanalysen mit dem Cambridge Crystallographic Data File

R. Hilgenfeld, W. Saenger
Komplexierung von Alkali- und Erdalkalimetallionen durch lineare Polyether

G. Kiel, H. Hlawatschek, G. Gattow
Dithiomalonsäurediamid – Beispiel für eine Helixstruktur

D. Knittel, G. Weber
Bestimmung der cis-trans-Konfiguration von α-Azidochalkonen

V. Staemmler, R. Jaquet
Quantenmechanische Berechnung der Struktur kleiner Radikale

W. Winter
Wie lang ist die Ethanbindung in Hexaphenylethan-Derivaten?

M. Noltemeyer, J. Jansen, W. Lüttke
Synthese und Röntgenstrukturanalyse des gekreuzt konjugierten Bis-(4,4-dimethyl-2,5-cyclohexadien-1-yliden)

S. Mohr
Asymmetrische Photodimerisierung in kristallinen Cyclohexaliden-oxazolonen

Anwendung von Kraftfeldverfahren

H.-D. Beckhaus
Struktur und Konformation hochsubstituierter Ethane

H.-J. Schneider, W. Gschwendtner, E. F. Weigand
Molekülmechanische Kraftfeldrechnungen und sterische Effekte auf ^{13}C-NMR-Verschiebungen bei ausgewählten Alicyclen, Bicyclen und Steroiden. Ein Vergleich mit NMR- und Röntgenkristallstrukturergebnissen

D. Lenoir, R. M. Frank, F. Cordt, A. Gieren, V. Lamm
Röntgenstruktur-Analyse von trans-1-Ethyl-2-(1-ethyl-2-adamantyliden)adamantan. Vergleich mit Kraftfeld-Rechnungen

U. Burkert
Die Konformationen der Oxacyclooctane

P. Lemmen, D. Lenoir
Kraftfeldrechnungen an Fluorenylidenfluorenen. Vergleich der berechneten Geometrie eines stark tordierten Olefins mit den Röntgenstrukturdaten

275 D. Cremer
Conformation Analysis of Cyclic Compounds (in German)

276 H. Siebels, A. Gieren
Comparative Structural Analyses by Means of the Cambridge Crystallographic Data File (in German)

277 R. Hilgenfeld, W. Saenger
Complexation of Alkali and Alkaline Earth Ions by Linear Polyethers (in German)

278 G. Kiel, H. Hlawatschek, G. Gattow
Dithiomalonic Diamide – Example for a Helix Structure (in German)

278 D. Knittel, G. Weber
Determination of the cis-trans-Configuration of α-Azidochalcones (in German)

279 V. Staemmler, R. Jaquet
Quantum-Chemical Calculation of the Structure of Small Radicals (in German)

279 W. Winter
How Long is the Ethane Bond in Hexaphenyl-Ethane Derivatives? (in German)

280 M. Noltemeyer, J. Jansen, W. Lüttke
Synthesis and X-Ray Structural Analysis of the Cross-Conjugated Bis-(4,4-dimethyl-2,5-cyclohexadiene-1-ylidene) (in German)

280 S. Mohr
Asymmetric Photodimerization in Crystalline Cyclohexylidene Oxazolones (in German)

Application of Force Field Methods

281 H.-D. Beckhaus
Structure and Conformation of High-Substituted Ethanes (in German)

282 H.-J. Schneider, W. Gschwendtner, E. F. Weigand
Molecular-Mechanic Force Field Calculations and Steric Effects on ^{13}C NMR Shifts for Selected Alicycles, Bicycles and Steroids. Comparison with NMR and X-Ray Crystal Structure Data (in German)

283 D. Lenoir, R. M. Frank, F. Cordt, A. Gieren, V. Lamm
X-Ray Structural Analysis of trans-1-Ethyl-2-(1-ethyl-2-adamantyl-idene)-adamantane. Comparison with Force Field Calculations (in German)

284 U. Burkert
The Conformations of Oxacyclooctanes (in German)

284 P. Lemmen, D. Lenoir
Force Field Calculations with Fluorenylidene Fluorenes. Comparison of the Calculated Geometry of a Strongly Twisted Olefin with the X-Ray Structural Data (in German)

J. Stegemann, H. J. Lindner
Packungseinflüsse auf die Konformationen substituierter 1,3,5-Cycloheptatriene

H. Preut, H.-J. Haupt
Kristallstrukturanalyse von $Re_4(CO)_{12}\{\mu\text{-Ga Re}(CO)_5\}_4$ über Röntgenbeugung und Gitterenergieberechnungen

Methodische und apparative Aspekte der Strukturanalyse

H. Bartl
Neutronen-Vierkreisdiffraktometer bei der KFA Jülich für externe Benutzer

H. Follner
Die Goldschmidtsche Komplikationsregel und die Tripelproduktmethode. Strukturinformationen aus morphologischen Daten organischer Kristalle

W. E. Klee
Graphen und Strukturen

R. Rothbauer, E. F. Paulus
Nichtstatistische Berechnung von Skalen- und Debye-Waller-Faktoren organischer Kristallstrukturen

G. Ruban
Renormierungsgruppen zur Beschreibung statistischer Fehlordnungen in Kristallen

Spezielle Strukturbestimmungsverfahren

H. Fuess
Untersuchung der magnetischen Momentdichte durch polarisierte Neutronen

R. Hosemann, A. Fischer, W. Vogel
Bedeutung des parakristallinen Zustandes für die heterogene Katalyse

H.-H. Schmidtke, H. Kupka, R. Wernicke
Die vibronische Kopplung in Koordinationsverbindungen am Beispiel von Hexahalogenkomplexen

285 J. Stegemann, H. J. Lindner
Effects of Packing on the Conformations of Substituted 1,3,5-Cycloheptatrienes (in German)

286 H. Preut, H.-J. Haupt
Crystal Structural Analysis of $Re_4(CO)_{12}\{\mu\text{-Ga Re}(CO)_5\}_4$ by Means of X-Ray Diffraction and Calculation of Lattice Energy (in German)

Aspects of Structure Analysis with Regard to Method and Equipment

286 H. Bartl
Neutron Four-Circle Diffractometer at NRE Jülich for External Users (in German)

287 H. Follner
The Goldschmidt Complication Rule and the Triple Product Method. Structure Information from Morphological Data of Organic Crystals (in German)

287 W. E. Klee
Graphs and Structures (in German)

288 R. Rothbauer, E. F. Paulus
Non-Statistical Calculation of Scale and Debye-Waller Factors of Organic Crystal Structures (in German)

288 G. Ruban
Renormalization Groups for the Description of Statistical Disorder in Crystals (in German)

Specific Methods for Structure Determination

289 H. Fuess
Examination of the Magnetic Moment Density by Polarized Neutrons (in German)

289 R. Hosemann, A. Fischer, W. Vogel
Significance of the Paracrystalline State for Heterogeneous Catalysis (in German)

290 H.-H. Schmidtke, H. Kupka, R. Wernicke
The Vibronic Coupling in Coordination Compounds. Hexahalogeno Complexes as Example (in German)

Band 304 (Schluß-)Heft 5 1980

erschienen/published Dezember 1980

Originalabhandlungen

M. Zell, K. Ballschmiter
Untersuchungen zur globalen Belastung der Umwelt. III. Spurenanalyse der polychlorierten Biphenyle (PCB) mit ECD-Glascapillar-Gas-Chromatographie in biologischen Umweltproben aus unterschiedlichen trophischen Stufen (in Englisch)

Original Papers

337 M. Zell, K. Ballschmiter
Baseline Studies of the Global Pollution. III. Trace Analysis of Polychlorinated Biphenyls (PCB) by ECD Glass Capillary Gas Chromatography in Environmental Samples of Different Trophic Levels

E. Schumacher, B. Hackmann
Coulometrische Reagenserzeugung über permselektive Phasengrenzen. I. Herstellung und Untersuchung selektiv ionenleitender Bleichalkogenidmembranen zum Zwecke der coulometrischen Pb^{2+}-Erzeugung

350 E. Schumacher, B. Hackmann
Coulometric Generation of Reagents using Permselective Interphases. I. Preparation and Characterization of Ion Conducting Lead-Chalcogenide Membranes with a View to Pb^{2+} Generation (in German)

E. Schumacher, B. Hackmann
Coulometrische Reagenserzeugung über permselektive Phasengrenzen. II. Entwicklung eines einfachen Puls-Coulometers

358 E. Schumacher, B. Hackmann
Coulometric Generation of Reagents using Permselective Interphases. II. Development of a Simple Pulse Coulometer (in German)

H. Jenett, J. Knecht, G. Stork
ESCA-Untersuchungen an aktivierten, Schwermetallionen anreichernden Silicageloberflächen (in Englisch)

362 H. Jenett, J. Knecht, G. Stork
ESCA-Studies on Activated Silicagel Surfaces Preconcentrating Heavy Metal Ions

J. Thiem, A. Sievers
Vorteilhafte Verwendung einfachen Kieselgels ($< 63\,\mu$) in der präparativen Hochdruck-Flüssigkeits-Chromatographie (HPLC)

369 J. Thiem, A. Sievers
Advantageous Application of Simple Silica Gels ($< 63\,\mu$) in Preparative HPLC (in German)

N. Becker, K. Unger
Synthese und Eigenschaften von chemisch modifizierten Siliciumdioxidträgern mit Dihydroxy-, Hydroxyamino- und Amino-Gruppen in der Adsorptions-Chromatographie (in Englisch)

374 N. Becker, K. Unger
Synthesis and Properties of Chemically Modified Dihydroxy-, Hydroxyamino- and Amino-Functional Silica Packings in Adsorption Chromatography

W. B. Ferng, G. A. Parker
Spektralphotometrische Chrombestimmung als Chrom-Peroxo-4-(2-pyridylazo)-resorcin-Komplex (in Englisch)

382 W. B. Ferng, G. A. Parker
Spectrophotometric Determination of Chromium as the Chromium-Peroxo-4-(2-pyridylazo)resorcinol Complex

J. Brandštetr, J. Huleja, I. Sajó, H. Strauß
Schnelle thermometrische Siliciumbestimmung in Gußeisen und Stahl

385 J. Brandštetr, J. Huleja, I. Sajó, H. Strauß
Rapid Thermometric Determination of Silicon in Cast Iron and Steel (in German)

K. Friedrich
Simultane, präzise und schnelle C- und N-Bestimmung in stabilen Carbonitriden und Nitriden

391 K. Friedrich
Simultaneous, Precise, and Rapid Determination of C and N in Refractory Carbonitrides and Nitrides (in German)

E. Vilcsek, G. Lohmann
Bestimmung von flüchtigen Berylliumverbindungen in Meteoriten

395 E. Vilcsek, G. Lohmann
Determination of Volatile Beryllium Compounds in Meteorites (in German)

H.-J. Schmahl, E. Hieke
Trennung und Identifizierung verschiedener auch in Kosmetika verwendeter antimikrobieller Stoffe mittels Dünnschicht-Chromatographie

398 H.-J. Schmahl, E. Hieke
Separation and Identification of some Antimicrobials used also in Cosmetic Products by means of Thin-Layer Chromatography (in German)

G. Renner, Ch. Hopfer
Photometrisches Verfahren zur Bestimmung von Nitrit in wäßrigen Lösungen und in Blut (in Englisch)

405 G. Renner, Ch. Hopfer
Photometric Method for the Determination of Nitrite in Aqueous Solutions and in Blood

H.-D. Dell, J. Fiedler, H. Jacobi, R. Kamp
Beitrag zur Bestimmung von 2-Oxo-pyrrolidin-Derivaten aus biologischem Material

407 H.-D. Dell, J. Fiedler, H. Jacobi, R. Kamp
Contribution to the Determination of 2-Oxo-pyrrolidine Derivatives in Biological Materials (in German)

K. C. Srivastava, K. P. Tiwari
Einfaches Verfahren zur dünnschicht-chromatographischen Trennung und Bestimmung von Prostaglandinen und anderen aus ^{14}C-Arachidonsäure in menschlichen Thrombocyten gebildeten Metaboliten (in Englisch)

412 K. C. Srivastava, K. P. Tiwari
A Simple Procedure for the Thin-Layer Chromatographic Separation and Determination of Prostaglandins and Other Metabolites Formed from ^{14}C-Arachidonic Acid in Human Blood Platelets

	pages	
Neue Bücher	33, 193	**New Books**
Referate		**Abstracts**
1 Allgemeine Analytische Chemie		1 General Analytical Chemistry
1.1 Grundlagen, Methoden, Apparate, Reagentien, Automation, Datenverarbeitung	35, 145, 195, 291	1.1 Fundamentals, Methods, Apparatus, Reagents, Automation, Data Processing
1.2 Anorganische Analyse (Elemente, Isotopen, Ionen, Komplexverbindungen)	47, 152, 304	1.2 Inorganic Analysis (Elements, isotopes, ions, complex compounds)
1.3 Organische Analyse (Elementaranalyse, Funktionelle Gruppen, Verbindungen, Strukturanalyse)	55, 204, 313	1.3 Organic Analysis (Elements, functional groups, compounds, structural analysis)
2 Spezielle Produkte und Anwendungsgebiete		2 Particular Products and Fields of Application
2.1 Anorganische industrielle Produkte (Metalle, Reaktormaterial, Salze, Oxide, Halbleiter, Glas, Keramik, Baustoffe, technische Lösungen u. a.)	59, 161, 209	2.1 Inorganic Industrial Products (Metals, reactor materials, salts, oxides, semiconductors, glass, ceramics, building materials, industrial solutions etc.)
2.2 Organische industrielle Produkte (Kohle, Erdöl, petrochemische Produkte, Kunststoffe, Textilien, Farbstoffe, Waschmittel, Zwischenstoffe, Papier, Leder, Gummi u. a.)	166, 213	2.2 Organic Industrial Products (Coal, petroleum, petrochemical products, plastics, textiles, dyes, detergents, intermediate products, paper, leather, rubber etc.)
2.3 Gesteine, Mineralien, Böden	170	2.3 Rocks, Minerals, Soils
2.4 Umweltrelevante Matrices (Luft, Gase, Abgase, Wasser, Abwasser, Müll u. a.)	66, 216, 318	2.4 Environmental Matrices (Air, gases, waste gases, water, waste water, solid wastes etc.)
2.5 Landwirtschaftlich-technische Produkte (Düngemittel, Pflanzen, Futtermittel, Holz u. a.)	224	2.5 Agricultural-Technical Products (Fertilizers, plants, feeding-stuffs, wood etc.)
2.6 Lebensmittel (Getreide, Hackfrüchte, Ölsaat, Obst, Gemüse, tierische Produkte, Gewürze, Zusatzstoffe, Getränke u. a.; Tabak und Tabakerzeugnisse)	70, 173, 323	2.6 Foods (Cereals, root crops, oil seeds, fruits, vegetables, animal products, spices, additives, beverages etc.; tobacco and tobacco products)
2.7 Schädlingsbekämpfungsmittel	178	2.7 Pesticides
2.8 Pharmazeutische Produkte und Kosmetica	77, 227	2.8 Pharmaceuticals and Cosmetics
3 Biochemische und klinische Analyse (Allgemeines, Elemente, einfache Körperstoffe, Aminosäuren, Peptide, Proteine, Nucleinsäuren, Lipide, Steroide, Hormone, Enzyme u. a.; Drogen, sonstige Gifte)	85, 181, 231, 328	3 Biochemical and Clinical Analysis (General, elements, simple body substances, amino-acids, peptides, proteins, nucleic acids, lipids, steroids, hormones, enzymes etc.; drugs, toxic substances)
Namenverzeichnis	417	**Author Index**
Sachverzeichnis	431	**Subject Index**
Neue Geräte und Chemikalien am Schluß der Hefte		For **New Equipments and Chemicals** see back of issues

Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York
J. F. Bergmann, München